Министерство образования и науки Российской Федерации
Московский физико-технический институт (государственный университет)
Факультет управления и прикладной математики
Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН
Кафедра «Интеллектуальные системы»

Фрей Александр Ильич

О дискретных аппроксимациях непрерывных вероятностных распределений

511656 - Математические и информационные технологии

Выпускная квалификационная работа бакалавра

Научный руководитель:
н.с. ВЦ РАН, к.ф.-м.н.
Воронцов Константин Вячеславович

Москва
2008

Содержание

Аннотация

Рассматривается задача оценивания вероятности больших уклонений средних значений в наблюдаемой и скрытой частях выборки. Делается попытка изучения непрерывных распределений чисто комбинаторными методами. Предлагается новый метод построения верхних оценок для вероятности больших уклонений. Суть метода заключается в замене исходной непрерывной выборки определенным дискретным аналогом, для которого вероятность большого уклонения вычисляется в явном виде. Предложен конкретный вид дискретного аналога исходной выборки, для которого в явном виде вычислена вероятность больших уклонений. Сформулирован корректный метод вычисления параметров дискретной выборки. Проведены вычислительные эксперименты. Найдены контрпримеры, при которых предложенные оценки не являются верхними.

1 Введение

В сильной вероятностной аксиоматике известны несколько неравенств, оценивающих вероятность отклонения суммы независимых случайных величин от своего среднего значения. Все они являются уточнениями неравенства Чебышева:

Теорема 1 (Чебышев)**.** *Пусть X — случайная величина. Тогда $\forall \varepsilon > 0$ выполнено:*

$$\mathsf{P}(|X - \mathsf{E}(X)| \geq \varepsilon) \leq \frac{\mathsf{D}(X)}{\varepsilon^2} \tag{1}$$

Введём некоторые обозначения. Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — независимые случайные величины. Обозначим $S_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$, и

$$\sigma_n^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathsf{D}\,(X_i).$$

В дальнейшем нас будет интересовать **односторонние** отклонения суммы случайных величин от своего среднего значения:

$$\mathsf{P}(S_n - \mathsf{E}(S_n) \geq \varepsilon) \leq \delta(\varepsilon).$$

Простейшее оценку для $\delta(\varepsilon)$ получаем из неравенства Чебышева-Кантелли:

Теорема 2 (Чебышев-Кантелли)**.** *В наших обозначениях $\forall \varepsilon > 0$ выполнено:*

$$\mathsf{P}(S_n - \mathsf{E}(S_n) \geq \varepsilon) \leq \frac{\sigma_n^2}{\sigma_n^2 + n\varepsilon^2} \tag{2}$$

Для суммы ограниченных случайных величин выполняется оценка Гефдинга (Hoeffding's inequality). Приведём ее формулировку:

Теорема 3 (Hoeffding)**.** *Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — независимые случайные величины, принимающие значение из отрезка $[0, 1]$ с вероятностью единица. Тогда $\forall \varepsilon > 0$ выполнено:*

$$\mathsf{P}(S_n - \mathsf{E}(S_n) \geq \varepsilon) \leq e^{-2n\varepsilon^2} \tag{3}$$

Более строгим является неравенство Бернштейна (Bernstein), уточняющее (3) при известной дисперсии случайных величин.

Теорема 4 (Bernstein)**.** *Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — независимые случайные величины, принимающие значение из отрезка $[0, 1]$ с вероятностью единица. Предположим, что $\mathsf{E}(S_n) = \frac{1}{2}$. Тогда $\forall \varepsilon > 0$ выполнено*

$$\mathsf{P}(S_n - \mathsf{E}(S_n) \geq \varepsilon) \leq \exp\left(-\frac{2n\varepsilon^2}{4\sigma_n^2 + \varepsilon}\right) \tag{4}$$

Неравенство МакДиармида (McDiarmid) обобщает (3) на случай произвольных функций от случайной величины (не обязательно суммы, как в неравенстве Гефдинга).

Все эти неравенства применяются, в частности, при оценке обобщающей способности алгоритмов классификации - для оценки отклонения доли ошибок на контрольной выборке от доли ошибок на обучающей выборке. Их недостаток заключается в том, что это "оценки худшего случая". Все эти неравенства существенно завышают величину $\mathsf{P}(S_n - \mathsf{E}(S_n) \geq \varepsilon)$.

К сожалению, все эти неравенства используют понятие меры. Кроме того, фигурирующие в неравенствах вероятности не поддаются непосредственному измерению. Рассмотрим постановку аналогичной задачи в слабой вероятностной аксиоматике, и постараемся сделать более точные комбинаторные оценки для вероятности больших уклонений.

2 Основные результаты

2.1 Определения

Напомним некоторые определения слабой вероятностной аксиоматики.

Определение 1. *Назовём* **выборкой** X^L *набор из* L *чисел:*

$$X^L = \{x_1, x_2, \dots, x_L\} \ \in \ \mathbb{R}^L.$$

Зафиксируем два числа - длину контроля k и длину обучения ℓ (так, что бы выполнялось условие $L = k + \ell$). Рассматриваются всевозможные разбиения выборки на два непересекающихся множества $X_n^L = X_n^k \cup X_n^\ell$, где $n \in \{1, ..., N\}$, а $N = C_L^k$ — количество различных разбиений.

Гипотеза 1. *Все разбиения равновероятны.*

Определение 2. Отклонением средних *назовём выражение*

$$D(X^k, X^\ell) = \frac{1}{k} \sum_{x \in X^k} x - \frac{1}{l} \sum_{x \in X^\ell} x \tag{5}$$

Отклонение средних можно также называть "переобученостью". Она показывает, на сколько больше ошибок выдаёт алгоритм на контроле по сравнению с обучением. Требуется оценить сверху эмпирическую функцию распределения переобучености — т.е. долю тех разбиений, в которых переобученость превышает заданный порог ε.

Определение 3. Вероятностью больших уклонений *будем называть выражение*

$$Q(X^L, \varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \big[D(X_n^k, X_n^\ell) \geq \varepsilon\big], \tag{6}$$

где квадратные скобки переводят истинное условие в единицу, а ложное - в ноль.

Наша задача получить верхнюю оценку $Q(X^L, \varepsilon) \leq \delta(\varepsilon)$, не зависящую от выборки X^L. Применительно к задачам оценки качества обучения будем называть параметр ε точностью, а $\delta(\varepsilon)$ — надежностью обучения.

2.2 Выборка Y_m^L, состоящая из нулей и единиц

Для вывода оценки типа Гефдинга естественно поместить выборку в единичный гиперкуб. В дальнейшем мы будем предполагать, что $X^L \in [0,1]^L$. Рассмотрим для начала случай выборки, лежащий непосредственно в вершинах единичного куба: $Y_m^L \in \{0,1\}^L$ (тут нижний индекс m означает число единиц в выборке: $m = \sum_{i=1}^L y_i$). Для этого случая известна точная комбинаторная оценка, выражаемая через сумму членов гипергеометрического распределения:

$$Q(Y_m^L, \varepsilon) = \sum_{t=s_0}^{s_1} h\left(\begin{smallmatrix}\ell & t\\ L & m\end{smallmatrix}\right), \tag{7}$$

где $s_0 = \max(0, m-k)$, $s_1 = \lfloor (m - \varepsilon k)\frac{\ell}{L} \rfloor$, $h\left(\begin{smallmatrix}\ell & t\\ L & m\end{smallmatrix}\right) = \frac{C_{L-m}^{\ell-t} C_m^t}{C_L^\ell}$.

Правда эта оценка надежности все еще зависит от выборки (точнее, от числа m — количества единиц в ней). Что бы избавиться от этого можно взять максимум от правой части выражения (7) по всем $m \in \{0 \dots L\}$. Этот максимум достигается либо при равном, либо при при отличающемся на единицу количестве нулей и единиц. Однако взяв максимум мы, тем самым, сильно завысим оценку (7).

Гипотеза 2 (Бадзян)**.**

$$Q(X^L, \varepsilon) \le \sup_{m \in \{1,\dots,L\}} Q(Y_m^L, \varepsilon) \tag{8}$$

Андрей Бадзян доказал эту гипотезу для частного случая $k = \ell = \frac{L}{2}$. Численные эксперименты показывают, что она выполняется и для $k \ne \ell$.

2.3 Трёхступенчатая выборка Z^L

Вместо Y_m^L можно рассмотреть другую выбору, более похожую на исходную X^L. Пусть $Z^L(n_q, n_1, q)$ — выборка, в которой n_q чисел равно q, n_1 единиц, а остальные числа равны 0.

Для неё можно вывести следующее выражение для вероятности больших уклонений:

$$Q(Z^L, \varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\ell_q=0}^{n_q} C_{n_q}^{\ell_q} \sum_{\ell_1=0}^{s_1} C_{L-n_q-n_1}^{\ell-\ell_q-\ell_1} C_{n_1}^{\ell_1}, \tag{9}$$

где

$$s_1 = \left\lfloor \frac{\ell(qn_q + n_1) - k\ell\varepsilon}{L} - \ell_q q \right\rfloor.$$

При $n_q = 0$ это выражение, как и следует ожидать, превращается в (7).

2.4 Вычисление параметров выборок Y_m^L и Z^L

Интересен такой вопрос: как избавиться от взятия максимума в (8)? Другими словами, можно ли каким-то конструктивным способом выбрать число m так, что неравенство по прежнему оставалось в силе. Достаточно очевидно, что $Q(X^L, \varepsilon)$ сильно зависит от дисперсии выборки. Вычисляя ее для Y_m^L, получим:

$$\mathsf{D}(Y_m^L) = \frac{m(L-m)}{L^2}.$$

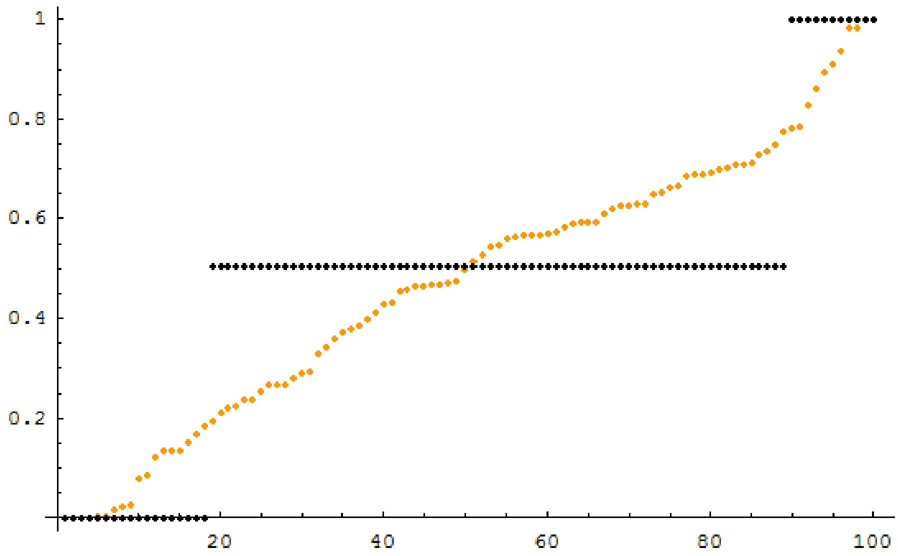


Рис. 1: Вариационные ряды X^L и Z^L

Идея заключается в том, что бы оценить дисперсию исходной выборки $\mathsf{D}(X^L)$ и выбрать число m исходя из равенства

$$\mathsf{D}(Y^L_m) = \mathsf{D}(X^L).$$

Оказывается, такой подход приводит к весьма точной оценке надежности. К сожалению, полученная оценка не является верхней - существуют контрпримеры (см. п. 3.4).

Пусть теперь мы хотим приблизить X^L трёхступенчатой выборкой Z^L. Возникает вопрос: какие параметры исходной выборки нужно знать, что бы с их помощью удачно вычислить параметры выборки Z^L? Попробуем воспользоваться методом моментов: обозначим 1й, 2й и 3й моменты исходной выборки X^L через $\mu_1 = \sum x_i$, $\mu_2 = \sum x_i^2$ и $\mu_3 = \sum x_i^3$. Приравнивая их к моментам выборки Z^L, получим значения искомых параметров:

$$\begin{cases} q = \dfrac{\mu_2 - \mu_3}{\mu_1 - \mu_2} \\ n_q = \dfrac{(\mu_1 - \mu_2)^3}{(\mu_2 - \mu_3)(\mu_1 - 2\mu_2 + \mu_3)} \\ n_1 = \dfrac{\mu_1\mu_3 - \mu_2^2}{\mu_1 - 2\mu_2 + \mu_3} \end{cases} \tag{10}$$

С помощью неравенства Коши-Буняковского-Шварца можно доказать теорему адекватности (о разумности полученных оценок):

$$0 \le q \le 1, \; n_0 \ge 0, \; n_q \ge 0, \; n_1 \ge 0.$$

На Рис. 1 изображены два вариационных ряда - ряд модельной выборки X^L (оранжевый цвет) и ряд выборки Z^L с параметрами, подобранными по формулам (10) (черный цвет). Выборки состоят из $L = 100$ чисел.

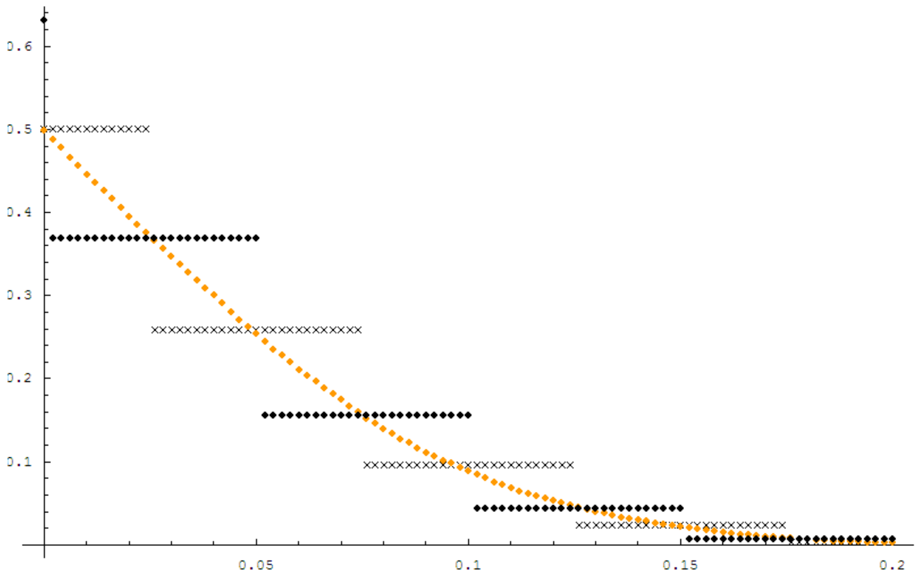


Рис. 2: Ступеньки на графиках - последствия априорного выбора округления.

Рассмотрим еще один, на первый взгляд даже более разумный, вариант выборки-заменителя. Вновь рассмотрим трёхступенчатую выборку и зафиксируем у нее положение ступеньки на уровне $\frac{1}{2}$. Теперь для выбора оставшихся двух параметров достаточно приравнять только первый и второй момент. Проделывая это, находим

$$\begin{cases} n_{0.5} = 2\mu_2 - \mu_1 \\ n_1 = 4(\mu_1 - \mu_2) \end{cases} \tag{11}$$

Для этой выборки уже нет теоремы адекватности: легко представить себе ситуацию, когда $\mu_2 < \frac{\mu_1}{2}$.

2.5 Округление

Напомним, что число единиц m в выборке Y_m^L предлагается выбирать исходя из равенства дисперсии. Однако вполне очевидно, что при $m \in \mathbb{N}$ можно добиться лишь приближенного равенства дисперсии. Для этого придётся округлить решение уравнения

$$\mathsf{D}(Y_m^L) = \mathsf{D}(X^L).$$

Приведём численный график, на котором оранжевая кривая соответствует графику $Q(X^L, \varepsilon)$ а два черных графики — функциям $Q(Y_{\lceil m \rceil}^L, \varepsilon)$ и $Q(Y_{\lfloor m \rfloor}^L, \varepsilon)$ (округление происходит либо всегда вверх, либо всегда вниз). Видно, что в зависимости от ε то один, то другой способ округления оказывается более предпочтительным.

Итак, если мы надеемся получить верхнюю оценку, нам придется для каждого ε рассматривать оба способа округления — $Q(Y_{\lceil m \rceil}^L)$, $Q(Y_{\lfloor m \rfloor}^L)$, и выбирать то, которое приводит к большей оценке вероятности большого уклонения. Аналогично предлагается поступать для трёхступенчатой выборки. Однако в этом случае не так просто перечислить все целые тройки чисел (n_0, n_q, n_1), приближающие истинное решение (10). Все такие точки мы будем называть **окрестностью округления**. Подробнее об округлении параметров трехступенчатой выборки см. в "Доказательствах".

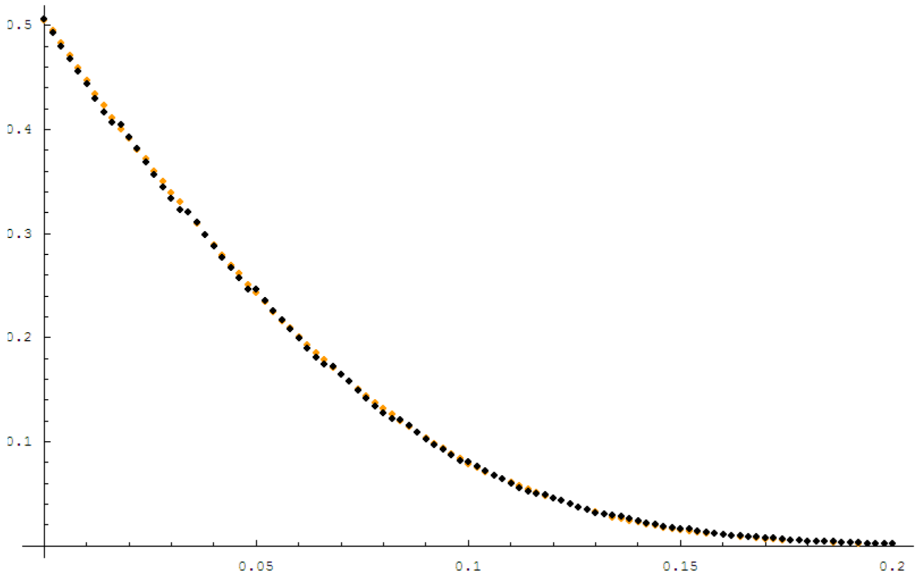


Рис. 3: Точность оценки при усреднении по окрестности округления

К сожалению ни одна из полученных оценок не является верхней. Как для выборки Y_m^L, так и для выборки Z^L существуют контрпримеры, показывающие что даже значительная свобода округления не приводит к строгому результату. В этой ситуации остаётся придумать эвристический метод, дающий как можно более точное приближение. Для этой цели логично не брать максимум, а **усреднять** по всем целочисленным точкам из окрестности округления подходящего размера. Следующий рисунок иллюстрирует точность, с который данный подход приближает истинное поведение зависимости вероятности большого уклонения от порога ε.

3 Доказательства

3.1 Явный вид выражения $Q(Z^L, \varepsilon)$

Теорема 5 (Вероятность большого уклонения трехступенчатой выборки)**.**

$$Q(Z^L, \varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\ell_q=0}^{n_q} C_{n_q}^{\ell_q} \sum_{\ell_1=0}^{s_1} C_{L-n_q-n_1}^{\ell-\ell_q-\ell_1} C_{n_1}^{\ell_1}, \tag{12}$$

где

$$s_1 = \left\lfloor \frac{\ell(qn_q + n_1) - k\ell\varepsilon}{L} - \ell_q q \right\rfloor.$$

Доказательство. Мы хотим вычислить выражение для вероятности большого уклонения выборки

$$Q(Z^L, \varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \left[D(Z_n^k, Z_n^\ell) \geq \varepsilon \right] \tag{13}$$

Пусть в тестовой подвыборке оказалось ℓ_q чисел со значением q и ℓ_1 единиц. Распишем условие, при котором выполнено $D(Z_n^k, Z_n^\ell) \geq \varepsilon$.

$$
\begin{aligned}
D(Z^\ell, Z^k) =& \frac{1}{k}\sum_{x\in Z^k} x - \frac{1}{\ell}\sum_{x\in Z^\ell} x \\
=& \frac{1}{k}((n_q-\ell_q)q + (n_1-\ell_1)) - \frac{1}{\ell}(\ell_q q + \ell_1) \\
=& \frac{L((n_1-\ell_1)+q(n_q-\ell_q)) - k(n_1+qn_q)}{k\ell} \geq \varepsilon.
\end{aligned}
\tag{14}
$$

Левая часть монотонно убывает при увеличении числа единиц в обучающей выборке. Обозначим через s_1 максимальное количество единиц, при котором наше условие выполняется. Выразим s_1 из (14):

$$
s_1 = \left\lfloor \frac{\ell(qn_q+n_1) - k\ell\varepsilon}{L} - \ell_q q \right\rfloor
$$

Теперь подсчитаем, сколькими способами в обучении могло оказаться ровно ℓ_1 из n_1 единиц, ровно ℓ_q из n_q чисел, равных q, и $\ell - \ell_1 - \ell_q$ из $L - n_1 - n_q$ нулей. Используя биномиальные коэффициенты, искомое выражение приобретает вид

$$
C_{L-n_q-n_1}^{\ell-\ell_q-\ell_1} C_{n_q}^{\ell_q} C_{n_1}^{\ell_1}
$$

Суммируя по всевозможным значениям ℓ_q и ℓ_1 получаем искомый результат:

$$
\begin{aligned}
&Q(Z^L,\varepsilon) = \\
&\frac{1}{N}\sum_{\ell_q=0}^{n_q}\sum_{\ell_1=0}^{n_1} C_{L-n_q-n_1}^{\ell-\ell_q-\ell_1} C_{n_q}^{\ell_q} C_{n_1}^{\ell_1}\left[\ell_q q + \ell_1 \leq \frac{k\ell\varepsilon + \ell(qn_q+n_1)}{L}\right] = \\
&\frac{1}{N}\sum_{\ell_q=0}^{n_q}\sum_{\ell_1=0}^{s_1} C_{L-n_q-n_1}^{\ell-\ell_q-\ell_1} C_{n_q}^{\ell_q} C_{n_1}^{\ell_1}.
\end{aligned}
\tag{15}
$$

Теорема доказана.

Замечание. Подставим в формулы предыдущей леммы $n_q = 0$. Получим

$$
s_1 = \left\lfloor (n_1 - k\varepsilon)\frac{\ell}{L} \right\rfloor
$$

$$
Q(Y_{n_1}^L, \varepsilon) = \frac{1}{N}\sum_{\ell_1=0}^{s_1} C_{L-n_1}^{\ell-\ell_1} C_{n_1}^{\ell_1}
$$

Теперь заметим, что $n_1 = m$, а начинать суммирование можно с $s_0 = \max(0, m-k)$. Действительно, если единиц в выборке больше, чем длина контроля то есть смысл рассматривать только $\geq (m-k)$ единиц в обучающей выборке (иначе соответствующий биномиальный коэффициент обнулится). Мы получили классическое выражение для суммы членов гипергеометрического распределения:

$$
Q(Y_m^L, \varepsilon) = \sum_{\ell_1=s_0}^{s_1} h\binom{\ell\,\ell_1}{L m},
$$

где $s_0 = \max(0, m-k)$, $s_1 = \lfloor (m - \varepsilon k)\,\frac{\ell}{L} \rfloor$, $h\binom{\ell\,t}{L m} = \frac{C_{L-m}^{\ell-t} C_m^t}{C_L^\ell}$.

3.2 Метод моментов. Теорема адекватности.

Теперь рассмотрим подробнее метод моментов для вычисления параметров выборки $Z^L(n_q, n_1, q)$.

Приравнивая моменты исходной выборки X^L и выборки Z^L получаем систему уравнений:

$$\begin{cases} \mu_1 = \sum x_i = n_q q + n_1 \\ \mu_2 = \sum x_i^2 = n_q q^2 + n_1 \\ \mu_3 = \sum x_i^3 = n_q q^3 + n_1 \end{cases}$$

Решая ее относительно n_q, n_1, q получим:

$$\begin{cases} q = \dfrac{\mu_2 - \mu_3}{\mu_1 - \mu_2} \\ n_q = \dfrac{(\mu_1 - \mu_2)^3}{(\mu_2 - \mu_3)(\mu_1 - 2\mu_2 + \mu_3)} \\ n_1 = \dfrac{\mu_1\mu_3 - \mu_2^2}{\mu_1 - 2\mu_2 + \mu_3} \end{cases} \tag{16}$$

.

Необходимо убедиться в том, что эти результаты "разумны" — т.е. проверить условия $0 \le q \le 1$, а так же $n_0 \ge 0$, $n_q \ge 0$ и $n_1 \ge 0$.

Теорема 6 (Теорема адекватности)**.** *Выражения (16) дают разумные значения параметров выборки Z^L:*

$$0 \le q \le 1, \; n_0 \ge 0, \; n_q \ge 0, \; n_1 \ge 0.$$

Доказательство. Напомним, что $x_i \in [0, 1]$, следовательно $x_i^3 \le x_i^2 \le x_i$. По определению $\mu_1 = \sum x_i$, $\mu_2 = \sum x_i^2$ и $\mu_3 = \sum x_i^3$, а значит $\mu_3 \le \mu_2 \le \mu_1$. Получаем

$$q = \frac{\mu_2 - \mu_3}{\mu_1 - \mu_2} \ge 0.$$

Теперь заметим, что из неравенства $0 \le (x_i - 1)^2$ следует $2x_i^2 \le x_i + x_i^3$. Тогда $2\mu_2 \le \mu_1 + \mu_3$ и $q \le 1$.

Теперь очевидно, что $n_q \ge 0$ (n_q является произведением положительных множителей). Для доказательства $n_1 \ge 0$ достаточно показать, что $\mu_1\mu_3 - \mu_2^2 \ge 0$. Рассмотрим вектора

$$u = (\sqrt{x_1}, \sqrt{x_2}, \ldots, \sqrt{x_L}) \;\in\; \mathbb{R}^L$$
$$v = (\sqrt{x_1^3}, \sqrt{x_2^3}, \ldots, \sqrt{x_L^3}) \;\in\; \mathbb{R}^L$$

Заметим, что $\|u\|^2 = \mu_1$, $\|v\|^2 = \mu_3$, $(u, v) = \mu_2$. Следовательно $\mu_1\mu_3 \ge \mu_2^2$ по неравенству Коши-Буняковского-Шварца. Таким образом, $n_1 \ge 0$.

Осталось показать, что $n_0 \ge 0$, т.е. $n_1 + n_q \le L$. Вычислим:

$$\begin{aligned} n_1 + n_q =& \frac{(\mu_1 - \mu_2)^3}{(\mu_2 - \mu_3)(\mu_1 - 2\mu_2 + \mu_3)} + \frac{\mu_1\mu_3 - \mu_2^2}{\mu_1 - 2\mu_2 + \mu_3} = \\ & \frac{\mu_1^2 + \mu_2^2 - \mu_1(\mu_2 + \mu_3)}{\mu_2 - \mu_3} = \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2 + \mu_1(\mu_2 - \mu_3)}{\mu_2 - \mu_3} = \\ & \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{\mu_2 - \mu_3} + \mu_1. \end{aligned}$$

Мы хотим показать, что это выражение не превосходит длины выборки L. Логично обозначить $L = \sum_{i=1}^{L} x_i^0 = \mu_0$. Следовательно, мы хотим доказать неравенство

$$(\mu_0 - \mu_1)(\mu_2 - \mu_3) \geq (\mu_1 - \mu_2)^2.$$

Это снова напоминает неравенство Коши-Буняковского-Шварца! Действительно, рассмотрим вектора

$$u = (\sqrt{1 - x_1}, \sqrt{1 - x_2}, \dots, \sqrt{1 - x_L}) \ \in \ \mathbb{R}^L$$
$$v = (\sqrt{x_1^2 - x_1^3}, \sqrt{x_2^2 - x_2^3}, \dots, \sqrt{x_L^2 - x_L^3}) \ \in \ \mathbb{R}^L$$

Эти вектора специально выбраны так, что квадраты их длин равны соответственно $\|u\|^2 = \mu_0 - \mu_1$ и $\|v\|^2 = \mu_2 - \mu_3$. Тогда их скалярное произведение записывается в виде

$$(u, v) = \sum_{i=1}^{L} \sqrt{(1 - x_i)(x_i^2 - x_i^3)}.$$

Учитывая то, что $(1 - x_i)(x_i^2 - x_i^3) = (1 - x_i)^2 x_i^2$ получаем следующее выражение для скалярного произведения:

$$(u, v) = \sum_{i=1}^{L} x_i(1 - x_i) = \mu_1 - \mu_2.$$

Следовательно по неравенству Коши-Буняковского-Шварца получим

$$(\mu_0 - \mu_1)(\mu_2 - \mu_3) = \|u\|^2 \|v\|^2 \geq (u, v)^2 = (\mu_1 - \mu_2)^2.$$

А значит $n_1 + n_q \leq L$, и следовательно $n_0 \geq 0$. Теорема адекватности доказана.

3.3 Округление параметров трехступенчатой выборки.

Вычислим количество способов округления трехступенчатой выборки. В ней есть три целых параметра - n_0, n_q и n_1, связанные условием $n_0 + n_q + n_1 = L$. Казалось бы, существует четыре способа округления: можно взять два любых параметра, и для каждого из них есть две возможности: округлять вниз и вверх. Однако один из этих четырех способов обязательно будет нарушать условие на суммарное количество чисел.

Пример. Пусть $L = 4$, а метод моментов дал оценки всех параметров, равные $\frac{4}{3}$. Тогда обязательное условие заключается в том, что два числа нужно округлить вниз, и только одно - вверх. Поэтому существует только три возможности. То же самое имеем и в общем случае.

Определение 4. Окрестностью округления $B_r(x_0, x_q, x_1)$ *назовём все целочисленные наборы параметров задачи, получаемые из тройки* (x_0, x_q, x_1) *изменением каждой координаты не более чем на* r*, при условии что сохраняется сумма параметров и все параметры остаются неотрицательными.*

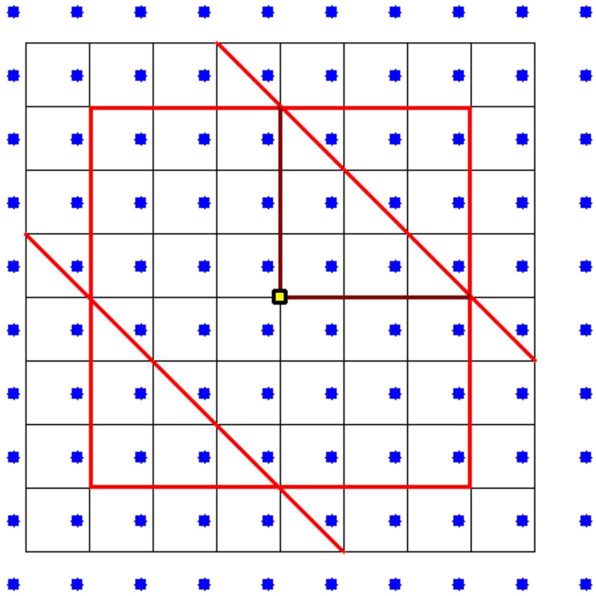


Рис. 4: Иллюстрация к доказательству леммы о размере окрестности.

Параметр r будем называть радиусом округления. Количество точек в окрестности назовем ее размером. Таким образом "округлению до соседнего целого" соответствует $r = 1$.

Очевидно, что размер окрестности радиуса r не превосходит $(2r)^2$. Действительно, в нашем распоряжении только два свободных параметра, и каждый из них может принимать $2r$ различных значений. Можно доказать следующее утверждение.

Теорема 7. *Пусть r является целым числом, и все параметры задачи (x_0, x_q, x_1) далеко (т.е. не менее чем на r) отстоят от граничных значений 0 и L и не являются целыми. Тогда размер окрестности простым образом выражается через её радиус:*

$$|B_r| = 3r^2.$$

□ Сформулируем для начала следующее вспомогательное утверждение.

Лемма 1. *Рассмотрим евклидову плоскость. Назовём узлами все её точки, у которых обе координаты — целочисленные. Пусть на плоскости размещен квадрат со стороной $n \in \mathbb{N}$, причем его стороны параллельны осям координат и не проходят через узлы целочисленной решётки.*

Утверждается, что внутри этого квадрата содержится ровно n^2 узлов.

Действительно, спроецируем квадрат на ось абсцисс. Получим отрезок $[a, a+n]$ (тут $a \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{N}$ - абсцисса левой стороны квадрата). В этом отрезке лежат следующие целые точки: $\lceil a \rceil, \ldots, \lfloor a+n \rfloor$, а их в точности n штук. Аналогично при проецировании на ось ординат получаем n точек, и следовательно внутри квадрата n^2 узлов.

Вернемся к нашей теореме. Обозначим центр окрестности округления через (X, Y, Z), Пусть (A, B, C) - целочисленная точка из нашей окрестности. Обозначим изменения координат $a = A - X$, $b = B - Y$, $c = C - Z$.

Из того, что сумма параметров при округлении сохраняется, следует условие $a + b + c = 0$. Значит нас интересует количество целочисленных троек (A, B, C), удовлетворяющих условию $|a| \le r$, $|b| \le r$, $|a + b| \le r$.

Рассмотрим квадрат $|a| \le r$, $|b| \le r$. Условия теоремы подобраны так, что ни одна из целочисленных точек (A, B) не попадает на его границу. Следовательно по утверждению доказанной леммы в квадрате содержится ровно $4r^2$ точек. Осталось доказать, что условие $|a + b| \le r$ отсекает ровно r^2 целочисленных точек (вне зависимости от значения дробных частей исходных параметров).

Это условие отсекает два треугольника площади $\frac{r^2}{2}$ каждый. Количество целочисленных точек, попавших в каждый из этих треугольников, подсчитать трудно. Однако совершенно очевидно, что в сумме в этих треугольниках ровно r^2 точек. Что бы в этом убедиться, достаточно нижний левый треугольник "пририсовать" в другом месте - непосредственно под правым верхним треугольником (от этого количество узлов внутри перемещаемого треугольника не изменится). Теперь можно вновь воспользоваться утверждением леммы для малого квадрата со стороной r.

Иллюстрацией вышесказанного служит Рис. 4. На нём синими квадратами отмечены целочисленные узлы решётки, желтая точка в середине — центр окрестности (округляемая точка), красными линиями показаны условия-ограничения.■

Для получения оценок предлагается рассматривать **все** точки из окрестности округления (с некоторым фиксированным радиусом и центром, полученным исходя из метода моментов).

3.4 Контрпримеры.

К сожалению, ни одна из предложенных оценок не является верхней. Тому есть несколько контрпримеров.

3.4.1 Контрпример для Y_m^L.

Приведём контрпример, который показывает, что выборка Y_m^L не приводит к верхней оценке, если параметр m выбирать исходя из дисперсии. Рассмотрим выборку $X^L = (0, 0, ..., 0, 0.25, 0.75, 1, ..., 1, 1)$. Количество нулей и единиц предполагается одинаковым, и равным $k - 1$. Выборочная дисперсия $\mathsf{D}(X^L) = \frac{4k-3}{16k}$. Решая уравнение $\mathsf{D}(Y_m^L) = \mathsf{D}(X^L)$ относительно m получаем находим

$$\frac{m(2k - m)}{4k^2} = \frac{4k - 3}{16k} \Rightarrow m = k \pm \sqrt{0.75k}$$

Два случая, отличающиеся плюсом и минусом, симметричны, и дают одинаковый результат для вероятности большого уклонения. Выберем знак минус. Вопрос округления этого числа решим в пользу завышения результата: будем рассматривать оба варианта - как $m = \lceil k + \sqrt{0.75k} \rceil$, так и $m = \lfloor k - \sqrt{0.75k} \rfloor$, и выбирать из них максимум. Выберем число ε такое, что бы $Q(Y_m, \varepsilon)$ равнялась нулю, а для исходной выборки была строго больше нуля. Наибольшая отклонение средних для Y_m будет при том разбиении, в котором все единицы попадут в контроль. Т.е необходимо положить

$$\varepsilon > \max_{n=1,\dots,N} D(X_n^k, X_n^\ell) = \frac{m}{k}.$$

Для исходной выборки рассмотрим разбиение, в котором в контроль попали числа, большие $\frac{1}{2}$. Тогда отклонение средних будет равно $\frac{(k-1)+0.75}{k}$, и необходимо положить ε меньше этого числа. Убедимся, что это возможно, т.е. $\lceil k - \sqrt{0.75k} \rceil < k - 0.25$. Это неравенство действительно выполнено при $k \geq 2$.

Проблема не только в том, что наша оценка перестает выполняться лишь при больших значениях ε. Рис. 6 показывает, что для рассмотренной нами выборки "проблемы" начинаются гораздо раньше.

3.4.2 Контрпример для Z^L.

Приведём контрпример, который показывает, что и выборка Z^L не приводит к верхней оценке. Приведенный рисунок соответствует выборке $X^L = (0, 0.2, 0.25, 0.85, 0.8, 1)$. Метод моментов даёт оценки $q \approx 0.50$, $n_q \approx 2.54$, $n_1 \approx 1.84$. Перебирая все 12 точек из B_2 и строя верхнюю огибающую всех полученных графиков для $Q(Z^L, \varepsilon)$ получаем Рис. 7 На нём отчетливо виден участок, где оранжевый график лежит выше черного.

4 Численные оценки

4.1 Классические верхние оценки

Сравним, для начала, поведение верхних оценок классических неравенств. На первый взгляд кажется, что неравенства Гефдинга (3) и Бернштейна (4) являются более строгими, чем простое неравенство Чебышева-Кантелли (2). Однако это далеко не всегда так. Убедимся в этом, построив графики верхних оценок этих неравенств в зависимости от значения порога ε. На Рис. 5 непрерывные графики соответствуют верхним оценкам Чебышева-Кантелли, Гёфдинга и Бернштейна.

Для сравнения приведены две точные функции $\mathsf{P}\left(S_n - \mathsf{E}\left(S_n\right) \geq \varepsilon\right)$. Гладкий график, построенный по черным точкам, соответствует равномерно-распределенной на $[0, 1]$ случайной величине. График, построенный по красным точкам, соответствует бернулиевской случайной величине, принимающей с вероятностью $\frac{1}{2}$ значения 0 или 1. Для каждой точки графика использовался метод Монте-Карло, оценивающий вероятность по $N = 10^5$ экспериментам. Во всех случаях количество суммируемых случайных величин $n = 7$, дисперсия случайной величины полагалась равной $\sigma^2 = \frac{1}{4}$.

Видно, что все три классических неравенства дают одинаковый по порядку величины результат, существенно завышающий истинную оценку. Более того, значения всех оценок начинаются с единицы, хотя для всех симметричных распределений график должен начинаться с $\frac{1}{2}$.

4.2 Численные результаты для комбинаторных оценок

Теперь рассмотрим несколько модельных выборок X^L (каждый раз $L = 100$) и исследуем зависимость $Q(X^L, \varepsilon)$ от ε. Во всех экспериментах длина контроля полагалась равной длине обучения ($k = \ell = 50$). Величина $Q(X^L, \varepsilon)$ вычислялась численно, по $N = 10^4$ случайным разбиениям. Для численных вычислений и построения графиков использовалась программа Mathematica 5.2.

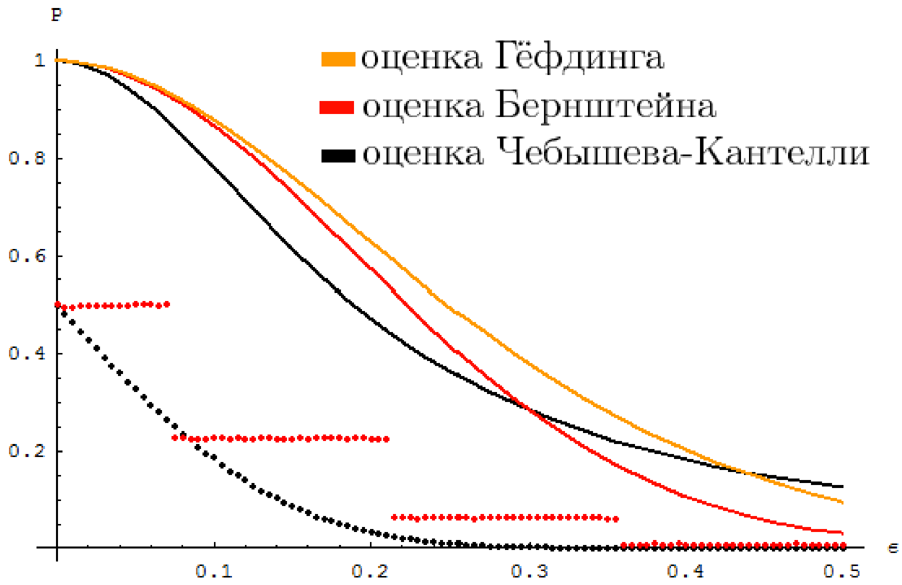


Рис. 5: Верхние оценки вероятности отклонения S_n от $\mathsf{E}(S_n)$

На каждом графике красным цветом отмечена оценка худшего случая, полученная из гипергеометрического распределения (т.е. $Q(Y^L, \varepsilon)$). Она совпадает с оценкой Андрея Баздяна, и по следствию из доказанной им теоремы всегда лежит выше всех остальных графиков. Оранжевым цветом изображена модельная выборка X^L, черным - выборка Z^L с параметрами, подобранными по методу моментов.

Для сравнения с классическими неравенствами (Чебышева-Кантелли, Гефдинга, Бернштейна) стоит отождествлять график, построенный по красным точкам (Рис. 4.1) и оценку гипергеометрического распределения.

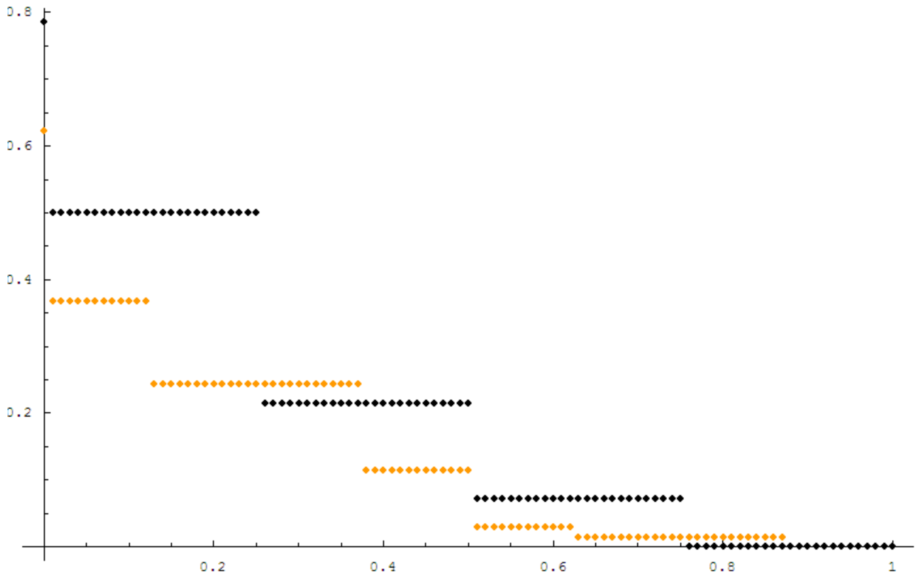


Рис. 6: Контрпример - $Q(Y_m^L, \varepsilon)$ оказывается ниже $Q(X^L, \varepsilon)$. L=8.

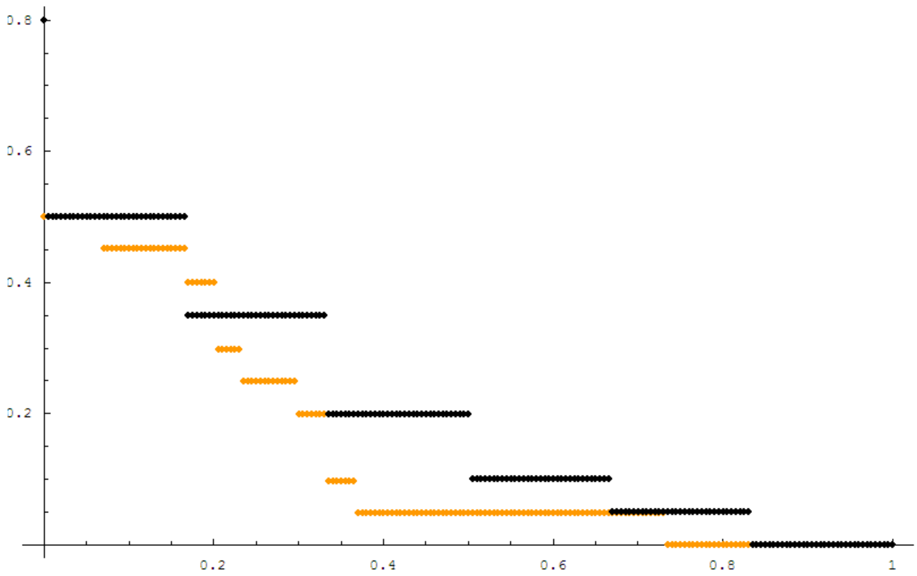
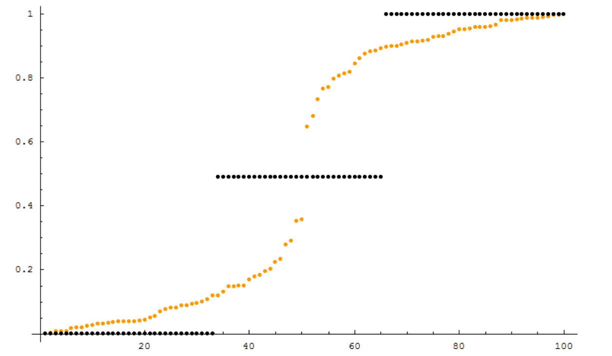
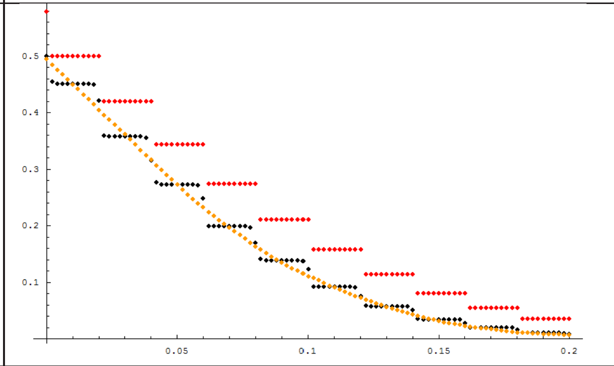
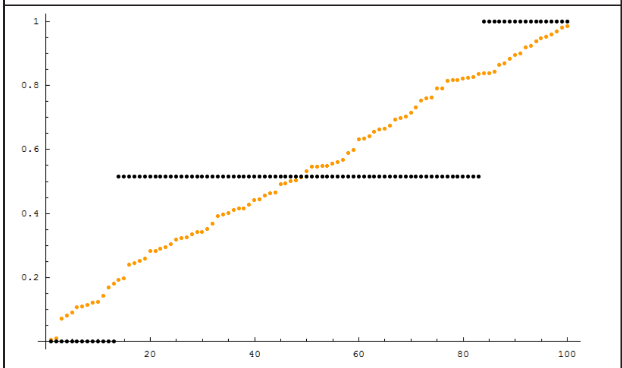
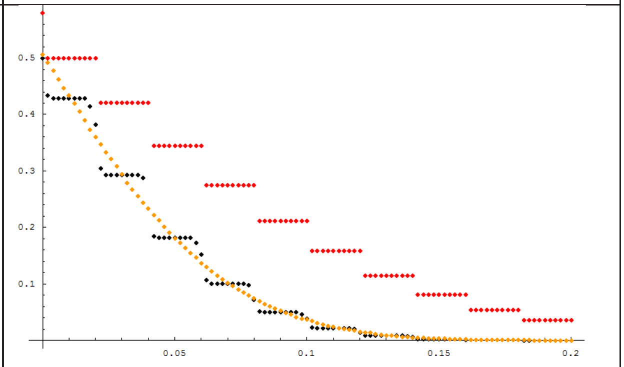
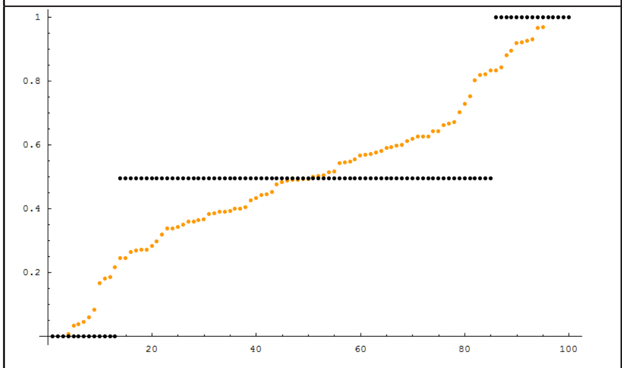
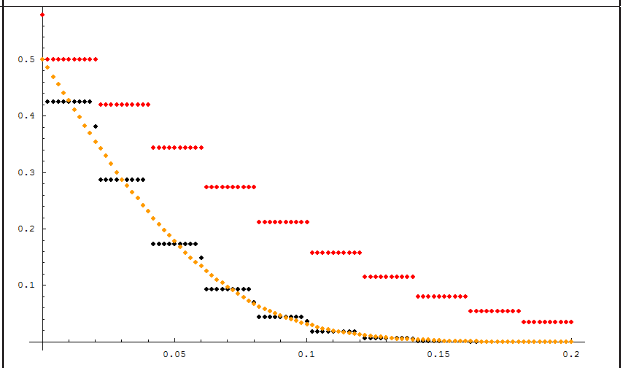
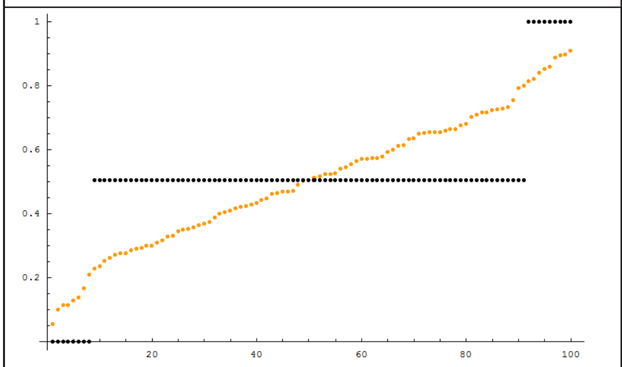
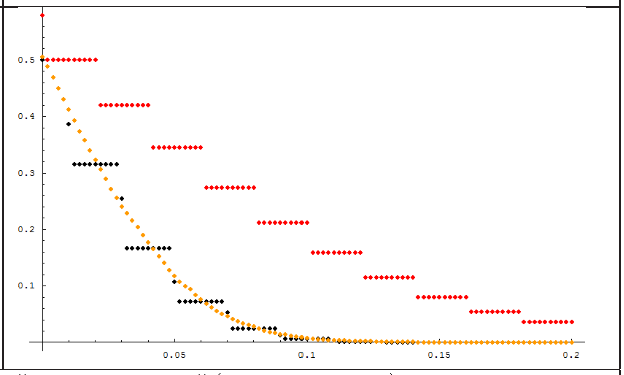


Рис. 7: Контрпример - $Q(Z^L, \varepsilon)$ оказывается ниже $Q(X^L, \varepsilon)$. L=6.

Вариационный ряд	Зависимость $Q(X^L, \varepsilon)$ от ε
	
	
	
	

Рисунки расположены по мере увеличения "гауссовости"(сверху вниз). Видно, что чем ближе распределение к Гауссу - тем больше различие между оценкой худшего случая и истинной зависимостью $Q(X^L, \varepsilon)$.

5 Заключение

В ходе работы предпринята попытка изучения непрерывных распределений комбинаторными методами. Предложена трехступенчатая выборка в качестве универсального аппроксиматора непрерывных распределений, лежащих на отрезке $[0, 1]$ С помощью удачного выбора параметров этой выборки удается аппроксимировать вероятность больших уклонений для достаточно широкого класса распределений.

В ходе дальнейших исследований предполагается исследовать чувствительность функционала $Q(Z^L, \varepsilon)$ к небольшому изменению параметров исходной выборки. Также предполагается получить асимптотические результаты для больших длин выборок L и оценить скорость сходимости.